**QM206 - 2022**

**PARCIAL I**

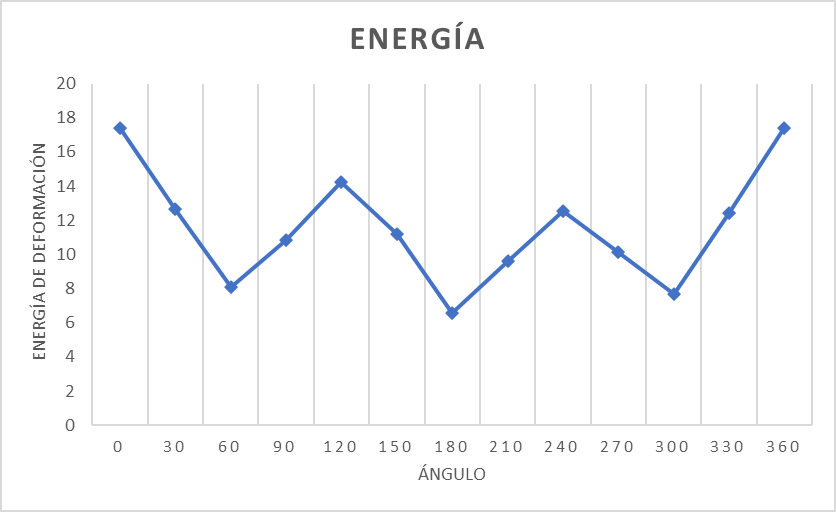
**NOMBRE:** Yahir Montenegro 4-817-2283

Realizar los siguientes cálculos utilizando los softwares utilizados en clases. Debe complementar sus cálculos con las imágenes correspondientes y anexar el enlace Github de los archivos generados.

**PROBLEMA 1:** DIAGRAMA DE ENERGÍA

[Yemhair09/pregunta-1 (github.com)](https://github.com/Yemhair09/pregunta-1)

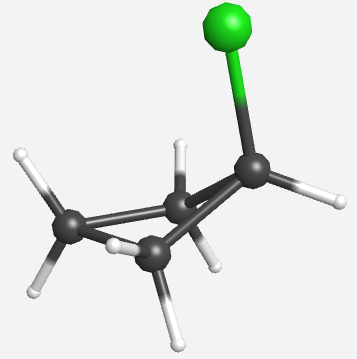
Construya un diagrama de energía vs ángulo de enlace para el 2,3-diclorobutano

****

**PROBLEMA 2:** OPTIMIZACIÓN DE LA GEOMETRÍA

[Yemhair09/Pregunta-2 (github.com)](https://github.com/Yemhair09/Pregunta-2)

1. Optimizar la geometría de la molécula de 1-clorociclobutano



1. Encontrar las energías de los diferentes modos de vibración

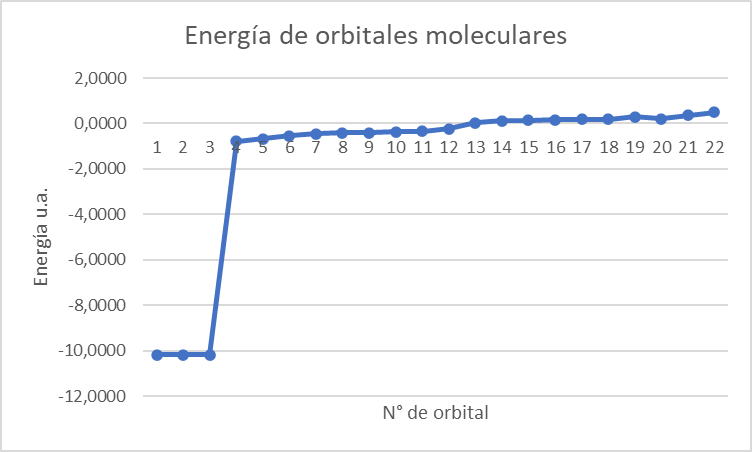




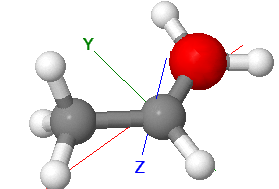
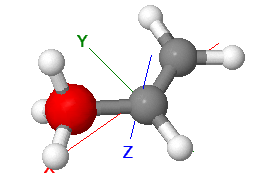
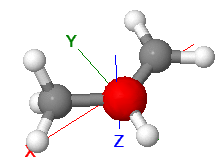
**PROBLEMA 3**: ORBITALES MOLECULARES

[Yemhair09/problema-3- (github.com)](https://github.com/Yemhair09/problema-3-)

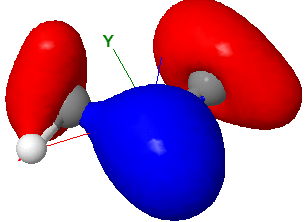
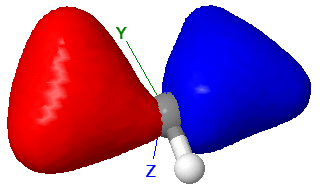
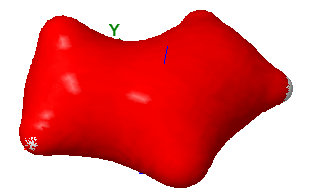
1. Construya un diagrama de energía para los orbitales moleculares del propileno. Para cada nivel de energía presente la imagen con la estructura del OM correspondiente



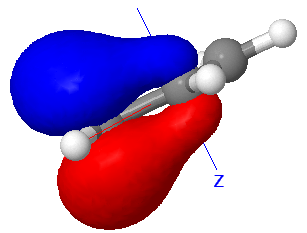
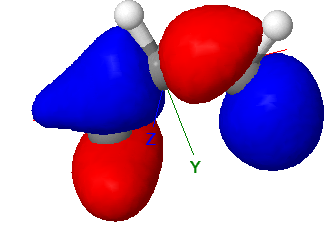
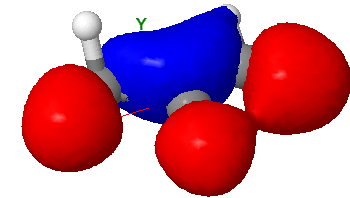
**Orbital 1 Orbital 2 Orbital 3**

****

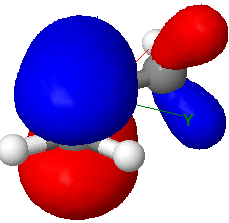
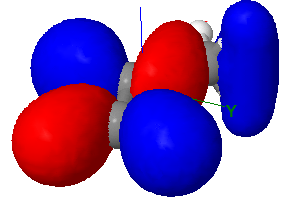
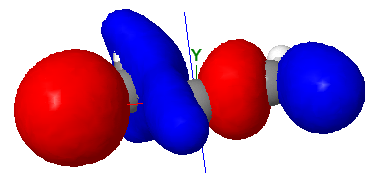
**Orbital 4 Orbital 5 Orbital 6**

****

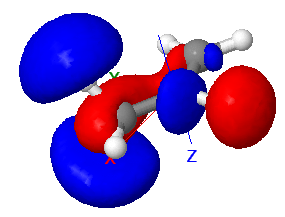
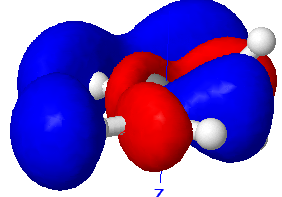
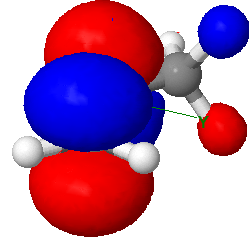
**Orbital 7 Orbital 8 Orbital 9**

****

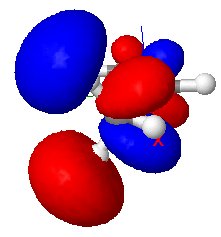
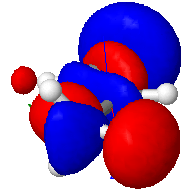
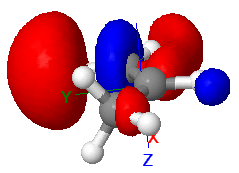
**Orbital 10 Orbital 11 Orbital 12**

****

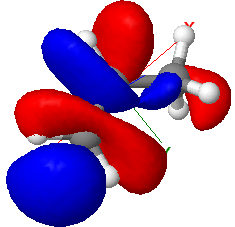
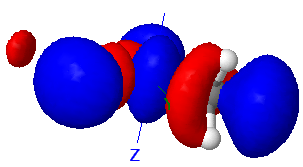
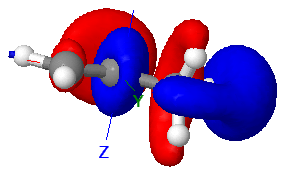
**Orbital 13 Orbital 14 Orbital 15**

****

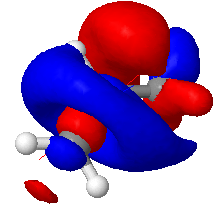
**Orbital 16 Orbital 17 Orbital 18**

****

**Orbital 19 Orbital 20 Orbital 21**

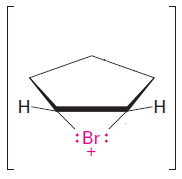
****

**Orbital 22**

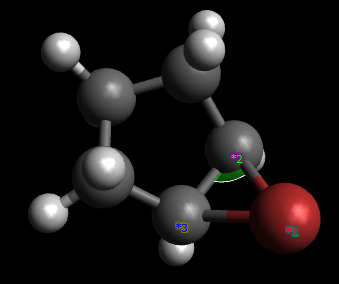
****

**PROBLEMA 4**: IÓN BROMONIO

[Yemhair09/Problema-4 (github.com)](https://github.com/Yemhair09/Problema-4)



1. Determine la estructura del ión bromonio indicado. Señale los ángulos correspondientes y distancia de enlaces C-Br



Ángulo de enlace: 68,1°

Distancia de enlace C-Br: 1,982Å